Posudek vedoucího diplomové práce
Kláry Sejkové

Využití spektrální metody při simulacích modelu fázového pole pro martenzitické transformace

Obsah práce

Diplomová práce se zabývá martenzitickými transformacemi v materiálech s tvarovou pamětí, které jsou zodpovědné za dva významné jevy: jev tvarové paměti a jev pseudoelasticity. Práce studuje mechanickou odezvou při transformaci mezi dvěma variantama martenzitu CuAlNi a k popisu využívá model fázového pole (phase-field model) pro martenzitické transformace. Studentka implementovala tento model pomocí spektrální metody a spočítala s ním několik problémů. Výpočetní náročnost spektrální metody srovnala s náročností konečných prvků.

Diplomová práce se skládá ze tří částí, v první kapitole diplomantka shrnula mechaniku kontinua pro pevné látky. Dále popsala klasickou krystalografickou teorii spolu s kinematickou podmínkou kompatibility na rozhraní dvou fází a jejího klasického řešení. Nakonec pomocí termodynamiky kontinua ze znalosti disipace a volné energie skládající se z objemové části a části rozhraní odvodila model fázového pole. V tomto modelu jsou fáze rozlišené neznámou p, která nabývá hodnot nula a jedna v jednotlivých fázích, a přechod z jedné fáze do druhé má hladce spojitý profil. Model je formulován ve tvaru nalezení minimizéru potenciálu rychlostního typu. Pro volnou energii rozhraní použila double-obstacle potenciál s omezením, jehož minimizér je sinus, a tedy v beznapěťové konfiguraci se profil mezi dvěma fázemi chová jako sinus. Studentka popisovala CuAlNi materiál s tvarovou pamětí, který vykazuje vysokou anizotropii. Pro popis objemové části volné energie tedy potřebuje použít anizotropní volnou energii. Studentka diskutuje různé anizotropní volné energie, které jsou polykonvexní, aby zajistila existenci jeho minimizéru.

Ve druhé kapitole diplomantka představí Fourierovu-Galerkinovu spektrální metodu pro řešení odvozené soustavy parciálních diferenciálních rovnic. Výpočetní oblastí je periodická krychle a jako bázové funkce používá trigonometrické polynomy. Pro výpočet derivací přechází mezi Fourierovým a fyzikálním prostorem, což je ve výpočtu reprezentováno pomocí násobení konstantní maticí, které je velmi rychlé.

Třetí kapitola popisuje implementaci odvozeného modelu pomocí spektrální metody v prostředí Matlab. Pro časovou aproximaci je zvoleno implicitní Eulerovo schéma s adaptivním časovým schématem. Nelinearity jsou počítány pomocí Newtonovy metody, potřebná lineární úloha je řešena pomocí spektrální metody. K sestavení lineární úlohy je třeba znát první a druhou Gateauxovu derivaci potenciálu. První derivace se dá spočítat analyticky dobře, ale druhá derivace je už bez chyb velmi těžko upočítatelná (nehledě na její případnou výpočetní náročnost). Proto je použita pro aproximaci druhé derivace plného nelineárního problému druhá derivace zjednodušeného problému pro malé deformace. Výsledná soustava lineárních rovnic je počítaná pomocí metody sdružených gradientů s předpodmíněním, metoda konverguje v méně než 10 iteracích. Pomocí implementovaného modelu studentka počítá několik problémů. Nejprve otestuje, že stacionární řešení odpovídá analytickému pro zafixované fáze. Následně předepíše průměrný deformační gradient v krychli a studuje evoluci s náhodného počátečního řešení. Opět pozoruje shodu s klasickou krystalografickou teorií. Dále studuje závislost mikrostruktury na předepsaném průměrném deformačním gradientu, který má vztah k poměru míchání dvou martenzitických variant. Pro tento problém se zdá, že numerické řešení neodpovídá očekávanému výsledku. Nakonec srovnává výpočetní čas potřebný k řešení obdobné úlohy pomocí metody konečných prvků napsaného v prostředí FEniCS. Zjišťuje, že obdobnou úlohu počítanou paralelním konečněprvkovým kódem na karlínském clusteru spočítá za obdobný čas sériovým spektrálním kódem na notebooku.

Hodnocení práce Předložená práce je jak po formální tak obsahové stránce kvalitní. Studentka si musela nastudovat modelování martenzitických transformací a podrobně pochopit, jak funguje Fourierova-Galerkinova spektrální metoda, kterou pak následně z nuly implementovala v Matlabu až na úroveň násobení dvou matic. To vyžadovalo extrémní úsilí v porovnání s poměrně přímočarou implementací netriviálního modelu ve FEniCSu. Ačkoli se zdá, že výpočet posledního problému není správný a někde v kódu je nejspíš ještě chyba, považuji práci za velmi přínosnou. Proto navrhuji předloženou práci uznat jako diplomovou práci a doporučuji ji hodnotit stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze

- V posledním příkladu počítáte problém, kde předepisujete průměrný deformační gradient odpovídající smíšenině dvou variant martenzitu o různých poměrech. Když se podívám na obrázek 3.7(a), $\bar{p} = 0.25$, nevypadá to, že čtvrtina krychle je obsazena jednou fází a zbytek jinou. Čím to?

- Studované problémy se dají řešit i analyticky a slouží tedy dobře jako benchmark, jak obtížné by bylo spočítat deformaci polykrystalu s různě natočenými částmi krystalu?

V Praze 30. června 2020
Karel Tůma
Matematický ústav Univerzity Karlovy